
UNIVERSITI SAINS MALAYSIA

First Semester Examination
Academic Session 2008/2009

November 2008

ZSC 548/4 – X Ray Structure Analysis
[Analisis Struktur Melalui Kaedah Sinar-X]

Duration: 3 hours
[Masa : 3 jam]

Please ensure that this examination paper contains **FIVE** printed pages before you begin the examination.

*[Sila pastikan bahawa kertas peperiksaan ini mengandungi **LIMA** muka surat yang bercetak sebelum anda memulakan peperiksaan ini.]*

Instruction: Answer all **FOUR** questions. Students are allowed to answer all questions in Bahasa Malaysia or in English.

[Arahan: Jawab semua **EMPAT** soalan. Pelajar dibenarkan menjawab semua soalan sama ada dalam Bahasa Malaysia atau Bahasa Inggeris.]

...2/-

1. a) State the defining symmetry elements of the seven crystal systems. What are the relationships between a , b , c , α , β & γ for each system?

[Nyatakan unsur-unsur simetri yang menakrifkan setiap sistem hablur bagi tujuh sistem hablur. Apakah perhubungan di antara a , b , c , α , β & γ dan bagi setiap sistem?]

(35/100)

- b) State the symmetry elements found in the 32 crystallographic point groups. Draw the stereograms for the following point groups :-

[Nyatakan unsur-unsur simetri yang terdapat di dalam 32 kumpulan titik kristalografi. Lukiskan stereogram bagi kumpulan titik yang berikut:-]

- i) $mm2$,
 ii) $\bar{4}2m$, and
 iii) $6/m$

(30/100)

- c) What are the extra symmetry elements that are present in space groups but not present in point groups?

[Apakah unsur-unsur simetri tambahan yang terdapat pada kumpulan ruang yang tidak dapat pada kumpulan titik]

Give the matrix representation of the symmetry elements in point group $2/m$.
 Berikan representasi matriks bagi unsur-unsur simetri di dalam kumpulan titik $2/m$.

Derive the space group $P\frac{21}{m}$ from the point group $2/m$ and draw the space group representation for $P\frac{21}{m}$.

[Terbitkan kumpulan ruang $P\frac{21}{m}$ daripada kumpulan titik $2/m$ dan melukiskan representasi kumpulan ruang $P\frac{21}{m}$]

(35/100)

...3/-

2. a) Write down the expression for the structure factor, \vec{F}_{hkl} . Derive the special structure factor, \vec{E}_{hkl} , from \vec{F}_{hkl} . Use the special structure, \vec{E}_{hkl} , to derive the systematic absences for the following cases: -

[Tuliskan ekspresi bagi factor struktur, \vec{F}_{hkl} . Terbitkan factor struktur khas, \vec{E}_{hkl} , daripada \vec{F}_{hkl} . Gunakan struktur factor khas, \vec{E}_{hkl} , untuk menerbitkan ketidakadaan sistematik bagi kes-kes berikut: -]

- i) C-face centering,
- ii) 2_1 screw axis along the a-axis, and
- iii) B-glide plane perpendicular to a-axis.

(60/100)

- b) Derive Friedel's Law. What is the significance of Friedel's Law.
[Terbitkan Hukum Friedel. Apakah kekuatan Hukum Friedel?]

What are the systematic absences present in the following space groups :-
[Apakah ketidakadaan sistematik yang terdapat pada kumpulan-kumpulan yang berikut :]

- i) $P \frac{21}{n}$
- ii) $Pbca$, and [dan]
- iii) $Ccca$

(40/100)

3. a) Write down the mathematical expression for the reciprocal lattice unit vector, \vec{a}^* , \vec{b}^* , and \vec{c}^* in terms of the direct lattice unit vector, \vec{a} , \vec{b} , and \vec{c} .

[Tuliskan ekspresi matematikal bagi vector unit kekisi resiprokal \vec{a}^* , \vec{b}^* , dan \vec{c}^* dalam sebutan unit vector kekisi terus, \vec{a} , \vec{b} dan \vec{c} .]

(10/100)

...4/-

- 4 -

- b) The vector condition for constructive interference is given by $\Delta \vec{K} = \vec{K}^1 - \vec{K} = \vec{G}$
[Keadaan vector bagi inteferens pembinaan adalah $\Delta \vec{K} = \vec{K}^1 - \vec{K} = \vec{G}$]

where \vec{K}^1 = outgoing wave – vector
[di mana] [vektor gelombang keluar]

\vec{K} = incoming wave – vector
[vektor gelombang datang]

and \vec{G} = reciprocal lattice vector
[dan] [vector kekisi resiprokal]

Use the Ewald Construction to demonstrate that $\Delta \vec{K} = \vec{G}$ is equivalent to $2d \sin \theta = \lambda$

[Gunakan Pembinaan Ewald untuk menunjukkan bahawa $\Delta \vec{K} = \vec{G}$ adalah setara dengan $2d \sin \theta = \lambda$]

Discuss the concept of limiting sphere. What is the maximum number of reflections that can be collected?

[Bincangkan konsep sfera terhad. Apakah nombor maksimum pantulan yang boleh dikumpulkan?]

(50/100)

- c) Explain the concept of rotation photography and how it can be used to measure the unit cell dimensions, a, b, and c of an orthorhombic crystal.
[Terangkan konsep fotografi putaran dan bagaimana ia boleh digunakan untuk mengukur dimensi sel unit a, b, dan c sesuatu hablur ortorombik.]

Explain how the reciprocal lattice of an orthorhombic crystal can be mapped using a combination of de-Jong Bouman and Buerger Precession techniques.
[Terangkan bagaimana kekisi resiprokal sesuatu hablur ortorombik dapat dipetakan dengan menggunakan kombinasi teknik de-Jong Bouman dan teknik Liukan Buerger].

Discuss the advantages and disadvantages of the (i) Weissenberg camera, (ii) Buerger Precession camera, and (iii) de-Jong Bouman camera.
[Bincangkan keuntungan dan keburukan (i) Kamera Weissenberg (ii) Kamera Liukan Buerger, dan (iii) Kamera de-Jong Bouman.]

(40/100)

...5/-

4. a) The electron density of a 1-D crystal is given by : -
 [Ketumputan electron bagi hablur 1-D diberikan oleh : -]

$$\rho(x) = \frac{1}{a} \sum_{k=-\infty}^{\infty} G(h) e^{-i2\pi h \frac{x}{a}}$$

The h^{th} structure factor is given by : -
 [Struktur faktor h^{th} diberikan oleh : -]

$$F(h) = \int_0^a \rho(x) e^{i2\pi h \frac{x}{a}} dx$$

Prove that $G(h) = F(h)$

Write the 3-D equivalent expressions of $\rho(\vec{r})$ and $\vec{F}(\vec{r})$ and use these 3-D expressions to explain the principle of single-crystal structure determination.

[Tuliskan ekspresi 3-D bagi $\rho(\vec{r})$ dan $\vec{F}(\vec{r})$ dan gunakan ekspresi 3-D itu untuk menerangkan prinsip penentuan struktur hablur tunggal.]

(50/100)

- b) Describe in details how the Heavy Atom Method is used to solve a structure containing a heavy atom.
 [Perihalkan secara teliti bagaimana Kaedah Atom Berat digunakan untuk menentukan struktur yang mengandungi satu atom berat.]

(30/100)

- c) Write brief notes on : -
 [Tuliskan nota-nota ringkas bagi : -]

- i) Data reduction, [Keturunan data,]
- ii) Direct Methods, and [Kaedah Terus, dan]
- iii) Structure refinement [Penhaluan Struktur]

(20/100)